学校编码：10384　　　　　　　　　　　分类号_______密级_______

学号：19020090153610　　　　　　　　　　　　　UDC_______

厦门大学

博　士　学　位　论　文

关于图的一些谱不变量的研究

On Some Spectral Invariants of Graphs

陈　小　丹

指导教师姓名：　钱　建　国　教授
　　　　　　　　张　福　基　教授

专　业　名　称：　应　用　数　学

论文提交日期：　2012 年　　月

论文答辩时间：　2012 年　　月

学位授予日期：　2012 年　　月

答辩委员会主席：____________

评　　阅　　人：____________

2012 年　　月

Doctoral Dissertation

On Some Spectral Invariants of Graphs

By

Xiaodan Chen

Supervisor: Professor Jianguo Qian

Professor Fuji Zhang

Speciality: Graph Theory

Institution: School of Mathematical Sciences

Xiamen University

Xiamen, P.R. China

April, 2012

厦门大学学位论文原创性声明

本人呈交的学位论文是本人在导师指导下，独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果，均在文中以适当方式明确标明，并符合法律规范和《厦门大学研究生学术活动规范（试行）》。

另外，该学位论文为（　　　　　　　　　　）课题（组）的研究成果，获得（　　　　　　　　　　）课题（组）经费或实验室的资助，在（　　　　　　　　　　）实验室完成。（请在以上括号内填写课题或课题组负责人或实验室名称，未有此项声明内容的，可以不作特别声明。）

声明人（签名）：

年　　月　　日

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人同意厦门大学根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》等规定保留和使用此学位论文，并向主管部门或其指定机构送交学位论文（包括纸质版和电子版），允许学位论文进入厦门大学图书馆及其数据库被查阅、借阅。本人同意厦门大学将学位论文加入全国博士、硕士学位论文共建单位数据库进行检索，将学位论文的标题和摘要汇编出版，采用影印、缩印或者其它方式合理复制学位论文。

本学位论文属于：

（　）1. 经厦门大学保密委员会审查核定的保密学位论文，于　　年　　月　　日解密，解密后适用上述授权。

（　）2. 不保密，适用上述授权。

（请在以上相应括号内打“√”或填上相应内容。保密学位论文应是已经厦门大学保密委员会审定过的学位论文，未经厦门大学保密委员会审定的学位论文均为公开学位论文。此声明栏不填写的，默认为公开学位论文，均适用上述授权。）

声明人（签名）：

年　　月　　日

关于图的一些谱不变量的研究

摘 要

图谱理论是代数图论的一个重要研究课题，它在量子化学、物理学、计算机科学、通信网络以及信息科学中均有非常重要的应用．图谱理论主要涉及图的邻接谱和 Laplacian 谱的研究，其研究的主要途径是通过图的矩阵 (主要是邻接矩阵和 Laplacian 矩阵) 表示，运用线性代数、矩阵理论等代数工具和技巧并结合图论与组合学的理论和方法，建立图的拓扑结构，特别是反映图的结构性质的各种不变量与图的代数不变量 (主要是一些谱不变量) 之间的联系．

图的预解 Estrada 指标、Laplacian 谱半径及 Laplacian 特征值幂和是图的三类有着广泛应用背景的谱不变量．本文首先综述了这三类谱不变量的相关背景及研究进展，然后分别对这三类谱不变量展开研究，得到了下面的一些结果：

(一) 在第二章中，我们主要对图的预解 Estrada 指标进行研究．首先我们得到了预解 Estrada 指标的一个非常重要的性质，即一个图的预解 Estrada 指标可由该图的特征多项式完全确定．利用这一性质，我们接下来分别研究了树和 r 部图的预解 Estrada 指标的一些极图问题，确定了具有前 13 大预解 Estrada 指标的树和具有最大预解 Estrada 指标的 r 部图．最后，我们还对图的预解 Estrada 指标的界进行了估计．

(二) 在第三章中，我们主要讨论树的 Laplacian 谱半径．首先我们改进了 Yuan 等人 [92] 关于树的 Lapalcian 谱半径与最大度之间关系的一个结果．在此基础上，我们进一步对完美匹配树的 Lapalcian 谱半径与最大度之间的关系进行了研究，发现它们之间同样也存在着严格递增的关系．根据这一发现，我们最终确定了具有前 20 大 Laplacian 谱半径的完美匹配树．

(三) 在第四章中，我们主要对连通图的 Laplacian 特征值幂和进行研究．首先我们利用著名的 Hölder 不等式建立了连通图的 Laplacian 特征值幂和与第一类 Zagreb 指标 (即度平方和) 的一个不等式；根据这个不等式，我们给出了连通图的 Laplacian 特征值幂和的界的一些新的估计．然后我们考虑了两种特殊图类，即色数给定或 (边) 连通度至多为 k 的连通图的 Laplacian 特征值幂和的极图问题，确定了这两类图的 Laplacian 特征值幂和的最大值或最小值，并刻画了达到这些值的极图．

关键词：图；树；邻接谱；Laplacian 谱；预解 Estrada 指标；Laplacian 谱半径；Laplacian 特征值幂和

On Some Spectral Invariants of Graphs

ABSTRACT

The spectral graph theory is one of the main branches in algebraic graph theory. There are a lot of important applications in the fields of quantum chemistry, physics, computer science, communication network and information science. It is mainly concerned with the adjacency spectrum and the Laplacian spectrum. The principal approach for this research is by using the matrix (mainly the adjacency matrix and the Laplacian matrix) representation of a graph, combined with the classical results and methods in linear algebra, matrix theory as well as graph theory and combinatorics, to establish connections between the topological structure of a graph, especially various topological invariants reflecting these structural information, and the algebraic invariants (mainly the spectral invariants) of the graph.

The resolvent Estrada index, the Laplacian spectral radius and the sum of powers of the Laplacian eigenvalues of a graph, which have extensive applications in various fields, are exactly the spectral invariants of the graph. In this thesis we first review the research backgrounds and developments concerning these spectral invariants. Then we investigate these spectral invariants, respectively. Our main results are as follows.

In Chapter 2, we mainly study the resolvent Estrada index of graphs. First, we obtain an important property concerning the resolvent Estrada index, i.e. the resolvent Estrada index of a graph is determined by the characteristic polynomial of the graph. As two examples, we apply this property to determine the first thirteen trees with the greatest resolvent Estrada index and characterize the r-partite graphs with maximum resolvent Estrada index, respectively. Finally, we give some estimation for the bounds of the resolvent Estrada index.

In Chapter 3, we mainly discuss the Laplacian spectral radius of trees. We first improve a result obtained by Yuan et al. [92], which concerns the relation between the Laplacian spectral radius and the maximum degree of a tree. Based on this result, we show that there is also a strictly increasing relationship between the Laplacian spectral radius and the maximum degree of a tree with perfect matchings. By using this conclusion, we determine the first 20th largest trees with perfect matchings according to their Laplacian spectral radius at last.

In Chapter 4, we mainly investigate the sum of powers of the Laplacian eigenvalues of connected graphs. By using the famous Hölder's inequality, we first establish an inequality concerning the sum of powers of the Laplacian eigenvalues and the first Zagreb index (i.e. the sum of squares of degrees) of connected graphs. Based on this inequality, we present some new bounds for the sum of powers of the Laplacian eigenvalues of connected graphs. Then we consider two extremal problems for the sum of powers of the Laplacian eigenvalues of connected graphs and characterize, respectively, the extremal graphs with given chromatic number or (edge) connectivity at most k which maximize or minimize the sum of powers of the Laplacian eigenvalues, where the corresponding maximum or minimum values are also determined.

Key Words: Graph; Tree; Adjacency spectrum; Laplacian spectrum; Resolvent Estrada index; Laplacian spectral radius; Sum of powers of Laplacian eigenvalues

目　录

CONTENTS

符号表

$V(G)$	图 G 的顶点集
$E(G)$	图 G 的边集
$N_G(v)$	图 G 中顶点 v 的邻集
$d_G(v)$	图 G 中顶点 v 的度
$\delta(G)$	图 G 的最小度
$\Delta(G)$	图 G 的最大度
$\kappa(G)$	图 G 的连通度
$\kappa'(G)$	图 G 的边连通度
$\beta(G)$	图 G 的匹配数
$\chi(G)$	图 G 的色数
$\tau(G)$	图 G 的生成树的数目
$\overline{G}$	图 G 的补图
$G \cup H$	图 G 和 H 的并图
$G \vee H$	图 G 和 H 的联图
P_n	n 个顶点的路 (图)
S_n	n 个顶点的星 (图)
C_n	n 个顶点的圈 (图)
K_n	n 个顶点的完全图
$\overline{K}_n$	n 个顶点的空图
$K_{a,b}$	完全二部图 (其中两部顶点数为 a, b)
$K_{n_1,n_2,\cdots,n_r}$	完全 r 部图 (其中各部顶点数为 $n_1, n_2, \cdots, n_k$)
$T_r(n)$	n 个顶点的 Turán 图
$A(G)$	图 G 的邻接矩阵
$L(G)$	图 G 的 Laplacian 矩阵
$\phi(G,\lambda)$	图 G 的特征多项式
$\sigma(G,\mu)$	图 G 的 Laplacian 多项式

$\lambda_i(G)$ 或 λ_i	图 G 的特征值
$\lambda_1(G)$ 或 λ_1	图 G 的谱半径
$M_k(G)$	图 G 的第 k 阶谱矩
$\mu_i(G)$ 或 μ_i	图 G 的 Laplacian 特征值
$\mu_1(G)$ 或 μ_1	图 G 的 Laplacian 谱半径
$\mathrm{Spec}(G)$	图 G 的谱
$\mathrm{Spec}_L(G)$	图 G 的 Laplacian 谱
$E(G)$	图 G 的能量
$EE(G)$	图 G 的 Estrada 指标
$REE(G)$	图 G 的预解 Estrada 指标
$Kf(G)$	图 G 的 Kirchhoff 指标
$LEL(G)$	图 G 的类 Laplacian 能量
$s_\alpha(G)$	图 G 的 Laplacian 特征值幂和
$Zg_1(G)$	图 G 的第一类 Zagreb 指标 (即度平方和)
$\mathcal{T}_{2N}$	顶点数为 $2N$ 的完美匹配树的集合
$\mathscr{V}_{n,k}$	顶点数为 n 且连通度至多为 k 的图的集合
$\mathscr{E}_{n,k}$	顶点数为 n 且边连通度至多为 k 的图的集合
$\lceil x \rceil$	不小于实数 x 的最小整数
$\lfloor x \rfloor$	不大于实数 x 的最大整数
$\cosh(x)$	双曲余弦函数

第一章　绪论

本文主要研究图的三类谱不变量，即预解 Estrada 指标、Laplacian 谱半径及 Laplacian 特征值幂和．本章首先介绍本文所需要的基本概念、术语和记号，然后综述本文所研究问题的相关背景及研究进展，最后简单介绍一下本文所得到的主要结果.

§ 1.1　基本概念和记号

本文所考虑的图均为有限无向的简单图．一个图 G 的顶点集和边集分别用 $V(G)$ 和 $E(G)$ 表示．若无特别说明，总是假定 $|V(G)| = n \geq 2$，$|E(G)| = m$，且 $V(G) = \{v_1, v_2, \cdots, v_n\}$；这样的图又称为 (n, m) - 图.

在图 G 中，如果顶点 u 和 v 关联同一条边 e，则称它们是相邻的，记为 $u \sim v$．顶点 u 和 v 称为边 e 的端点．在简单图中，e 也可记为 uv．G 中与顶点 v 相邻的所有顶点的集合称为 v 的邻集，记为 $N_G(v)$．称顶点 v 为孤立点，如果 $|N_G(v)| = 0$．G 中与顶点 v 关联的边的数目称为顶点 v 的度，记为 $d_G(v)$．注意到 G 的所有顶点的度之和是它的所有边的数目的两倍 [5]，即

$$\sum_{v \in V(G)} d_G(v) = 2m \tag{1.1.1}$$

称顶点 v 为悬挂点，如果 $d_G(v) = 1$．用 $\delta(G)$ 和 $\Delta(G)$ 分别表示 G 的顶点的最小度和最大度．如果对 G 的所有顶点 v，有 $d_G(v) = k$，则称 G 是 k 正则的.

图 G 的一条 (v_0, v_k) 途径是指一个有限非空序列 $W = v_0e_1v_1e_2v_2\cdots e_kv_k$，它的项交替地为顶点和边，使得对 $1 \leq i \leq k$，e_i 的端点是 v_{i-1} 和 v_i．其中 v_0 和 v_k 称为 W 的起点和终点，整数 k 称为 W 的长．如果途径 W 的边 $e_1, e_2, \cdots, e_k$ 互不相同，则 W 称为迹；如果途径 W 的顶点 $v_0, v_1, \cdots, v_k$ 也互不相同，则 W 称为路．n 个顶点的路 (图) 记为 P_n．称途径 (迹、路) W 是闭的，如果 $k > 0$ 且 $v_0 = v_k$．其中闭路又称为圈，长为 k 的圈称为 k 圈；按 k 是

奇数还是偶数，称 k 圈为奇圈或偶圈；3 圈常称为三角形．n 个顶点的圈 (图) 记为 C_n．在简单图中，(闭) 途径、(闭) 迹和 (闭) 路均可简单地由其顶点序列 $v_0v_1\cdots v_k$ 来表示．

图 G 的两个顶点 u 和 v 称为连通的，如果在 G 中存在一条 (u,v) 途径．图 G 连通当且仅当 G 中任意两个顶点均是连通的．图 G 的 (连通) 分支定义为 G 的一个极大连通子图；G 的 (连通) 分支的个数记为 $\omega(G)$．显然，G 连通的一个充分必要条件是 $\omega(G)=1$．

设 V' 是 $V(G)$ 的一个非空子集．则 $G-V'$ 表示从 G 中删除 V' 中的顶点以及与这些顶点相关联的边所得到的子图；特别地，当 $V'=\{v\}$ 时，把 $G-\{v\}$ 简记为 $G-v$．设 E' 是 $E(G)$ 的一个非空子集．则 $G-E'$ 和 $G+E'$ 分别表示从 G 中删除和添加 E' 中的边所得到的子图；特别地，当 $E'=\{e\}$ 时，用 $G-e$ 和 $G+e$ 来分别代替 $G-\{e\}$ 和 $G+\{e\}$．在简单图 G 中，称顶点 v 为 G 的割点，如果 $\omega(G-v)>\omega(G)$；称边 e 为 G 的割边，如果 $\omega(G-e)>\omega(G)$．

如果图 G 至少有两个不相邻的顶点，则定义它的连通度 $\kappa(G)$ 为最小的自然数 k，使得 G 存在一个 k 元顶点子集 V' 满足 $G-V'$ 不连通；否则定义 $\kappa(G)=n-1$．相应地，定义 G 的边连通度 $\kappa'(G)$ 为最小的自然数 k，使得 G 存在一个 k 元边子集 E' 满足 $G-E'$ 不连通．众所周知 [5]，

$$\kappa(G)\leq\kappa'(G)\leq\delta(G) \tag{1.1.2}$$

设 M 是 $E(G)$ 的一个子集．如果 M 中的任意两条边均无公共端点，则称 M 为 G 的匹配；特别地，称 M 为 G 的 k - 匹配，如果 $|M|=k$．如果 G 没有另外的匹配 M'，使得 $|M'|>|M|$，则称 M 为 G 的最大匹配，且称 $|M|$ 为 G 的匹配数，记为 $\beta(G)$；特别地，称 M 为 G 的完美匹配，如果 $2|M|=n$，即 M 中的边恰好关联 G 的所有顶点．具有完美匹配的图简称完美匹配图．

图 G 的一个 k 顶点着色是指 k 种颜色 $1,2,\cdots,k$ 对于 G 的各顶点的一个分配；称着色是正常的，如果任意两个相邻的顶点均分配到不同的颜色．事实上，图 G 的一个正常的 k 顶点着色是把 $V(G)$ 分成 k 个 (可能有空的) 子集，其中每个子集内的顶点均分配一样的颜色，即互不相邻．图 G 的色数 $\chi(G)$ 定义为最小的自然数 k，使得 G 存在一个正常的 k 顶点着色．